

Moderne Theoretische Physik III (TP)

Vorlesung 4

Kirill Melnikov
TTP KIT
April 24, 2024



4 Streuung am Atomen mit Fermi Goldener Regel

Wir betrachten einen Zusammenstoß eines Atoms mit einem Elektron. Das Atom befindet sich im Grundzustand. Wir nehmen an dass das Atom ist zu schwierig um sich zu bewegen, aber es kann zu einem angeregten Zustand übergehen. Wir wollen die Wahrscheinlichkeit berechnen, dass nach der Streuung das Elektron bestimmte Energie und Streuwinkel hat, und dass das Atom sich in einem gegebenen Zustand befindet.

Die Anfangsformel für die Analyse dieses Problems ist die Fermi Goldene Regel. Die Regel definiert die Übergangswahrscheinlichkeiten pro Zeiteinheit zwischen den Anfangs- und Endzuständen eines Systems welche einer Störung U verursacht. Generell, muss diese Störung eine periodische Funktion der Zeit sein aber für unseres Problem ist die Störung zeitunabhängig. Dann gilt

$$dW_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |U_{fi}|^2 \delta(E_i + \epsilon_i - E_f - \epsilon_f) d\nu_f, \quad (4.1)$$

wobei $d\nu_f$ die Dichte von Zuständen ist in welchen das Elektron mit der Energie E_f nach der Streeung sich befinden kann.

Wir wollen alle Grösse und Parameter die für unseres Problem relevant sind, spezifizieren. Wir fangen mit Anfangszustand an. Der Anfangzustand lautet

$$|i\rangle = \psi_{e,i}(\vec{r}_e) \psi_{a,i}(\{\vec{r}_n\}), \quad (4.2)$$

wobei \vec{r}_e and \vec{r}_n die Ortsvektoren des Elektrons b.z.w. der Konstituenten des Atoms beschreiben. Das Elektron beschreiben wir mit einlaufender ebener Welle

$$\psi_{e,i}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{p}_i \cdot \vec{r} / \hbar}, \quad (4.3)$$

wobei V das Volumen ist. Die Endzustandwellenfunktion ist

$$|f\rangle = \psi_{e,f}(\vec{r}_e) \psi_{a,f}(\{\vec{r}_n\}), \quad (4.4)$$

Die Wellenfunktion des auslafenden Elektrons ist

$$\psi_{e,f}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{p}_f \cdot \vec{r} / \hbar}. \quad (4.5)$$

Die Störung U ist das Coulomb-Potential welches die Wechselwirkung zwischen Konstituenten des Atoms und das Elektron beschreibt

$$U(\vec{r}, \{\vec{r}_a\}) = \sum_a \frac{ee_a}{|\vec{r} - \vec{r}_a|}, \quad (4.6)$$

Das Matrixelement U_{fi} in Gl. (4.1) lautet

$$\langle f|U|i\rangle = \sum_{b=1}^N \int \frac{d^3\vec{r}}{V} \prod_{a=1}^N d^3\vec{r}_a e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \psi_{A,f}^*(\{\vec{r}_a\}) \left[\frac{ee_b}{|\vec{r}-\vec{r}_b|} \right] \psi_{A,i}(\{\vec{r}_a\}), \quad (4.7)$$

wobei $\vec{q} = (\vec{p}_f - \vec{p}_i)/\hbar$ ist. Um dieses Integral zu vereinfachen, machen wir eine Variablentransformation $\vec{r} \rightarrow \vec{r} + \vec{r}_b$. Dann

$$\langle f|U|i\rangle = e^2 \int \frac{d^3\vec{r}}{V} \frac{e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}}{r} F_{fi}(\vec{q}), \quad (4.8)$$

wobei Funktion $F_{fi}(\vec{q})$ lautet

$$\begin{aligned} F_{fi}(\vec{q}) &= \sum_{b=1}^N \int \prod_{a=1}^N d^3\vec{r}_a \psi_{A,f}(\{\vec{r}_a\}) \frac{e_b}{e} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_b} \psi_{A,i}(\{\vec{r}_a\}) \\ &= \langle f_A | \sum_{b=1}^N \frac{e_b}{e} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_b} | i_A \rangle. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Diese Funktion nennen wir den *Formfaktor* des Atoms. Falls $f = i$, ist die Streuung elastisch und es gibt keine Energieübergabe vom Atom zum Elektron. Falls $f \neq i$, gibt es Energieübergabe; in diesem Fall bezeichnen wir die Streuung als *inelastische Streuung*.

Um die Berechnung des Matrixelements U_{fi} zur Ende zu bringen, sollen wir über \vec{r} in Gl. (4.8) zu integrieren. Die Integration ist einfach; wir benutzen

$$\int \frac{d^3\vec{r}}{r} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} = \frac{4\pi}{\vec{q}^2}, \quad (4.10)$$

und erhalten

$$\langle f|U|i\rangle = \frac{4\pi e^2}{\vec{q}^2 V} F_{fi}(\vec{q}). \quad (4.11)$$

Um die Berechnung von dw_{fi} zu beenden, sollen wir die δ -Funktion in Gl. (4.1) loswerden. Um das zu erreichen, brauchen wir die Zustandsdichte des Elektrons $d\nu_f$ explizit zu schreiben.

Um die Zustandsdichte des Elektrons zu berechnen, betrachten wir den Elektron in einer Box periodischen Randbedingungen. Das Volumen der Box ist V . Die Wellenfunktion ist

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}, \quad k_i = \frac{2\pi n_i}{L_i}, \quad i = x, y, z, \quad (4.12)$$

womit wir folgende Zustandsdichte erhalten:

$$d\nu_f = \Delta n_x \Delta n_y \Delta n_z = \frac{L_x dk_x}{(2\pi)} \frac{L_y dk_y}{(2\pi)} \frac{L_z dk_z}{(2\pi)} = \frac{V d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} = \frac{V d^3 \vec{p}_f}{(2\pi \hbar)^3}. \quad (4.13)$$

Um dieses Ergebniss zu benutzen um δ -Funktion loszuwerden, sollen wir alle Energien explizit zu schreiben. Das Argument der delta-Function ist

$$E_{f_A} + \frac{\vec{p}_f^2}{2m} - E_{i_A} - \frac{\vec{p}_i^2}{2m}. \quad (4.14)$$

Dann schreiben wir

$$\frac{V d^3 \vec{p}_f}{(2\pi \hbar)^3} = \frac{V m p_f d\Omega_f}{(2\pi \hbar)^3} d\left(\frac{p_f^2}{2m}\right). \quad (4.15)$$

Mit Hilfe dieser Darstellung, es ist einfach über die Energie des Elektrons im Endzustand zu integrieren. Für die Übergangswahrscheinlichkeit erhalten wir

$$\begin{aligned} w_{fi} &= \frac{2\pi V m p_f}{\hbar^4} \frac{d\Omega_{\vec{p}_f}}{(2\pi)^3} \left| \frac{4\pi e^2}{\vec{q}^2 V} F_{f_A i_A}(\vec{q}) \right|^2 \\ &= \frac{4e^4 m p_f}{\hbar^4 V (\vec{q}^2)^2} d\Omega_{\vec{p}_f} |F_{f_A i_A}(\vec{q})|^2. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Die Übergangswahrscheinlichkeit fängt von Anfangszustand; je mehr Elektronen wir in Richtung des Atoms schicken, desto grosser ist die Warscheinlichkeit dass die Streuung passiert; mit der Beschreibung von Wechselwirkung hat es wenig zu tun.

Dementsprechend definieren wir den Wirkungsquerschnitt als

$$d\sigma = \frac{dw_{fi}}{J}, \quad (4.17)$$

wobei J der Strom der einlaufenden Elektronen ist. Für eine einlaufende ebene Welle ist der Strom

$$J = \frac{p_i}{mV}, \quad (4.18)$$

und wir erhalten

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\vec{p}_f}} = \frac{4e^4 m^2}{\hbar^4 (\vec{q}^2)^2} \frac{p_f}{p_i} |F_{f_A i_A}(\vec{q})|^2. \quad (4.19)$$

Es ist zu bemerken dass in diese Formel alle komische Faktoren wie z.B. das Volumen V verschwunden sind.

Wir wollen jetzt verschiedene Situationen analysieren und fangen mit elastischer Streuung an. Es folgt aus Gl. (4.19), dass wir den Formfaktor brauchen um die Streuung vollständig beschreiben zu können.

Um Formfaktor zu berechnen, brauchen wir Wellenfunktionen des Atoms, die wir für komplexe Atome nicht direkt berechnen können. Allerdings, können wir in bestimmten Fälle etwas über F_{i_A} sagen. In der Tat, falls \vec{q} sehr klein ist, können wir die e-Funktion in \vec{q} entwickeln. Wir nehmen an dass $|i_A\rangle$ eine S-Welle ist und erhalten dass

$$\langle i_A | \sum_{a=1}^N \frac{e_a}{e} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_a} | i_A \rangle = \langle i_A | \sum_{a=1}^N \frac{e_a}{e} \left(1 + \frac{1}{2} (\vec{q}\cdot\vec{r}_a)^2 \right) | i_A \rangle = Q_A^2 + \frac{\vec{q}^2}{6} R^2, \quad (4.20)$$

wobei Q_A die elektrische Ladung des Atoms in Einheiten von elektrischer Ladung des Elektron ist, und

$$R^2 = \langle i_A | \sum_{a=1}^N \frac{e_a}{e} r_a^2 | i_A \rangle. \quad (4.21)$$

Die Grösse R nennen wir *Ladungsradius*.

Wir performen ähnliche Analyse für inelastische Streuung. Die Entwicklung des Formfaktors in \vec{q} in diesem Fal führt zu

$$\langle f_A | \sum_{a=1}^N \frac{e_a}{e} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_a} | i_A \rangle = \langle f_A | \sum_{a=1}^N \frac{e_a}{e} (1 + i\vec{q}\cdot\vec{r}_a) | i_A \rangle = e^{-1} i \vec{d}_{fi}, \quad (4.22)$$

wobei

$$\vec{d}_{fi} = \langle f_A | \sum_{a=1}^N e_q \vec{r}_a | i_A \rangle \quad (4.23)$$

das Matricelement des Dipoleoperators des Atoms ist. Der Wirkungsquerschnitt der inelastischen Streuung lautet dann

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\vec{p}_f}} = \frac{4e^2 m^2}{\hbar^4 (\vec{q}^2)^2} |\vec{d}_{fi}|^2. \quad (4.24)$$

Zum Schluss, diskutieren wir die inelastische Streuung und *die Energie-Verluste des schnellen geladenen Teilchens im Medium*. Wir bezeichnen die Dichte der Atome im Medium mit n . Auf der Strecke dx gibt es, im Durchschnitt, $n\sigma_{f_A i_A} dx$. Zusammenstöße mit einem Übergang vom Atom-Zustand i_A zum Atom-Zustand f_A . Im jeden Übergang verliert das Teilchen die Energie $\delta T = T_f - T_i = (E_{i_A} - E_{f_A})$. D.h. dass die Energieverluste des Teilchens mit folgender Formel berechnet werden kann

$$\frac{dT}{dx} = \sum_f (E_{i_A} - E_{f_A}) n \sigma_{fi}. \quad (4.25)$$

Den Wirkungsquerschnitt erhalten wir aus Gl. (4.19) nachdem wir über den Winkel integrieren. Wir finden

$$\frac{dT}{dx} = n \sum_f (E_{i_A} - E_{f_A}) \int d\Omega_{\vec{p}_f} \frac{4e^4 m^2}{\hbar^4 (\vec{q}^2)^2} \frac{p_f}{p_i} |F_{f_A i_A}(\vec{q})|^2. \quad (4.26)$$

Es ist hilfreich die Integration über den Winkel als Integration über die Impuls-Übertragung $\hbar^2 \vec{q}^2$ umzuschreiben. Das Verhältnis zwischen diesen zwei Variablen lautet

$$\hbar^2 \vec{q}^2 = (\vec{p}_f - \vec{p}_i)^2 = p_f^2 + p_i^2 - 2p_f p_i \cos \theta, \quad (4.27)$$

sodass

$$d \cos \theta = \frac{\hbar^2 d\vec{q}^2}{2p_f p_i}. \quad (4.28)$$

Wir erhalten dann

$$\frac{dT}{dx} = \frac{4\pi e^4 m^2}{\hbar^2 p_i^2} \sum_f (E_{i_A} - E_{f_A}) \int_{q_{\min}^2}^{q_{\max}^2} \frac{d\vec{q}^2}{|\vec{q}|^4} |F_{f_A i_A}(\vec{q})|^2. \quad (4.29)$$

Die Integrationsgrenzen sind von E_{f_A} und E_{i_A} abhängig; das bedeutet dass es nicht möglich ist, die Reihenfolge der Aufsummierung und der Integration zu vertauschen.

Allerdings, es stellt sich heraus dass diese Abhängigkeit schwach ist; wir werden später erfahren warum es so ist. Die obige Formel kann unter diese

Umständen stark vereinfacht werden. In der Tat, wir vertauschen die Aufsummierung und die Integration, und benutzen gemittelte Werte von $q_{\min, \max}^2$ als Integration-Grenzen, die wir später spezifizieren. Wir finden

$$\frac{dT}{dx} = \frac{4\pi e^4 m^2}{\hbar^2 p_i^2} \int_{\bar{q}_{\min}^2}^{\bar{q}_{\max}^2} \frac{dq^2}{q^4} \sum_f (E_{i_A} - E_{f_A}) |F_{f_A i_A}(\vec{q})|^2. \quad (4.30)$$

Die Summe in obiger Gleichung kann exakt berechnet werden. Für $e_a = e$ gilt¹

$$S(\vec{q}) = \sum_f (E_{i_A} - E_{f_A}) |F_{f_A i_A}(\vec{q})|^2 = -\frac{\hbar^2 q^2 Z}{2m}, \quad (4.31)$$

wobei Z die Zahl der Elektronen in Atom ist. Um diese Formel zu beweisen, schreiben wir

$$F_{f_A i_A}(\vec{q}) = \langle f | \sum_a e^{i\vec{q}\vec{r}_a/\hbar} | i \rangle = \langle f | \mathcal{O} | i \rangle \quad (4.32)$$

Weil S nur von \vec{q}^2 abhängt, gilt

$$S(\vec{q}) = \frac{1}{2}(S(\vec{q}) + S(-\vec{q})) = \frac{1}{2} \sum_f (E_{i_A} - E_{f_A}) [|\langle f | \mathcal{O} | i \rangle|^2 + |\langle f | \mathcal{O}^+ | i \rangle|^2]. \quad (4.33)$$

Zwei Terme auf der rechten Seite obiger Gleichung schreiben wir um wie folgt

$$\begin{aligned} \sum_f (E_{i_A} - E_{f_A}) |\langle f | \mathcal{O} | i \rangle|^2 &= \sum_f (E_{i_A} - E_{f_A}) \langle i | \mathcal{O}^+ | f \rangle \langle f | \mathcal{O} | i \rangle \\ &= - \sum_f \langle i | \mathcal{O}^+ | f \rangle \langle f | [H, \mathcal{O}] | i \rangle = - \langle i | \mathcal{O}^+ [H, \mathcal{O}] | i \rangle, \end{aligned} \quad (4.34)$$

und, ähnlich,

$$\sum_f (E_{i_A} - E_{f_A}) |\langle f | \mathcal{O}^+ | i \rangle|^2 = \langle i | [H, \mathcal{O}] \mathcal{O}^+ | i \rangle. \quad (4.35)$$

Dann erhalten wir

$$S = \frac{1}{2} \langle i | [[H, \mathcal{O}], \mathcal{O}^+] | i \rangle. \quad (4.36)$$

¹Der Atomkern trägt bei inelastischer Streuung nicht bei.

Es bleibt nun die Kommutatoren zu berechnen. Wir finden

$$[H, \mathcal{O}] = \frac{\hbar}{2m} \sum_a (\vec{p}_a \vec{q} e^{i\vec{q}\vec{r}_a} + e^{i\vec{q}\vec{r}_a} \vec{p}_a \vec{q}), \quad (4.37)$$

und danach

$$[[H, \mathcal{O}], \mathcal{O}^+] = -\frac{\hbar^2 \vec{q}^2 Z}{m}. \quad (4.38)$$

Aus Gl. (4.38,4.36) folgt schließlich Gl. (4.31).

Gl. (4.30) können wir dann umschreiben

$$\frac{dT}{dx} = -\frac{n\pi Z e_0^4}{T} \int_{\vec{q}_{\min}^2}^{\vec{q}_{\max}^2} \frac{dq^2}{q^2} = -\frac{n\pi Z e^4}{T} \ln \frac{\vec{q}_{\max}^2}{\vec{q}_{\min}^2}. \quad (4.39)$$

Wir sollen nun die Werte von $\vec{q}_{\max(\min)}^2$ abschätzen. Es ist wichtig dass die Abhängigkeit des Energie-Verlustes von $\vec{q}_{\max,\min}^2$ nur logarithmisch abhängt. Der Logarithmus ändert sich ziemlich langsam; deswegen sind die exakte Werte von $\vec{q}_{\max,\min}^2$ unwichtig.

Um diese Werte abzuschätzen, schreiben wir die Formel für Impuls-Übertragung

$$q^2 = p_f^2 + p_i^2 - 2p_f p_i \cos \theta. \quad (4.40)$$

Dann sind

$$q_{\max}^2 = (p_f + p_i)^2, \quad (4.41)$$

und

$$q_{\min}^2 = (p_f - p_i)^2, \quad (4.42)$$

Es folgt

$$q_{\max}^2 \sim p_i^2 \sim mT, \quad (4.43)$$

wobei T die kinetische Energie des Teilchens ist. Für q_{\min}^2 finden wir

$$q_{\min}^2 \sim \frac{m^2 (E_{f_A} - E_{i_A})^2}{p_i^2} \sim \frac{m\bar{E}^2}{T}, \quad (4.44)$$

wobei \bar{E} eine typische Energie gebundenen Zustands des Atoms ist. Wir benutzen diese Ergebnisse in Gl. (4.39) und finden die sogenannte Bethe-Formel

$$\frac{dT}{dx} = -\frac{n\pi Z e^4}{T} \ln \frac{T}{\bar{E}}, \quad (4.45)$$

die Energie-Verluste energetisches Teilchens in Medium beschreibt.